

Calculs de spéciation dans les eaux naturelles: la nécessité de quantifier les différents types de matière organique naturelle

Vitalys Mba ekomo¹ et Montserrat Filella^{1,2}

¹LIEC, Université de Lorraine, Campus Bridoux, F-57070 Metz, France

²Institut F.-A. Forel, Université de Genève, Route de Suisse 10, CH-1290 Versoix, Suisse

Selon les principes sur lesquels repose la modélisation thermodynamique de la spéciation chimique, il est nécessaire de connaître la concentration totale de tous les composants, métaux et ligands, afin d'effectuer des calculs de spéciation. Toutefois, la capacité apparente de certains modèles de spéciation largement utilisés de prédire raisonnablement les concentrations d'ions métalliques libres dans les eaux naturels s'appuie sur des pratiques qui diffèrent du principe énoncé ci-dessous. Dans la pratique, cela signifie que la concentration de la partie «active» de la matière organique naturelle (MON) est soit utilisée en tant que paramètre d'ajustement, soit fixée avec une valeur arbitraire. Dans le premier cas, les utilisateurs varient leur concentration de MON «active» afin d'obtenir un bon ajustement. Dans le deuxième, ils utilisent une valeur qui a été calculée précédemment dans d'autres systèmes. Dans les deux cas, et comme mentionné acertadamente par Cabaniss [1], bien que la procédure peut donner de bons ajustements, les résultats obtenus fournissent peu d'information à niveau mécanistique et ont peu de valeur prédictive. Les valeurs de concentration de MON ainsi utilisées dans les calculs n'ont pas de signification physique, car elles contiennent (aussi) toute autre source de variabilité (ou même d'erreur) dans le système. En pratique, le procédé confère un caractère essentiellement empirique à une procédure de modélisation qui était déterministique à l'origine. Le cas de l'application d'un code largement utilisé, WHAM [2], sera examiné pour illustrer la problématique. La détermination de la quantité de MON présente dans le système, et susceptible de complexer les éléments trace, s'avère donc nécessaire.

[1] S.E. Cabaniss, *Forward modeling of metal complexation by NOM: I. A priori prediction of conditional constants and speciation*. Environ. Sci. Technol., 43, 2838-2844(2009).

[2] E. Tipping, *Cation Binding by Humic Substances*. Cambridge University Press, Cambridge, 2002.